VISIT…

LANZAROTE Caliente.COM

Вычислительные технологии **Том 5, № 6, 2000**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ХОЛЕССКОГО — СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ЛАПЛАСА*

В. В. Альчиков, В. И. Быков
Красноярский государственный технический университет, Россия
e-mail: sek@ksc.krasn.ru

The problems of using the Cholesski's incomplete factorization — conjugate gradients method for the iterational solution of three dimensional Laplace equations in bit-homogeneous surrounddings are discussed.

Решение уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0 \tag{1}$$

в трехмерной области Ω с заданными граничными условиями в результате аппроксимации сводится к построению решения системы линейных алгебраических уравнений

$$AU = b \tag{2}$$

большого порядка с семидиагональной симметричной положительно определенной матрицей A. При этом возникают проблемы сходимости, времени счета и необходимого объема памяти компьютера. Для решения алгебраических систем известны методы неполной факторизации, обладающие рекордной скоростью сходимости итерационных процессов [1–4]. Один из этих методов используется в данной работе.

Рассмотрим задачу решения уравнения Лапласа (1), в общем случае кусочно-однородной относительно некоторого физического параметра p (электропроводность, магнитная проницаемость, упругость и др.) среды, заполняющей область Ω. На каждой из поверхностей S разрыва параметра p должны выполняться граничные условия

$$U^+ = U^-, \tag{3}$$

$$p^+ \frac{\partial U^+}{\partial n} = p^- \frac{\partial U^-}{\partial n}, \tag{4}$$

где p^+, U^+ и p^-, U^- — значения параметра p и функции U на внутренней и внешней сторонах поверхности S соответственно. Такая задача эквивалентна задаче определения

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ.
© В. В. Альчиков, В. И. Быков, 2000.

электрических потенциалов U поля постоянного тока, когда параметром p является электропроводность среды σ. Граничные условия (3), (4) в данном случае означают непрерывность потенциала и тока, нормального к поверхности S.

Пусть Ω — параллелепипед с гранями, параллельными координатным плоскостям. Используя электрическую модель кусочно-однородной среды, разобьем Ω плоскостями, параллельными координатным плоскостям, на элементарные объемы $V_{i,j,k}$ с заданными значениями электропроводностей $\sigma_{i,j,k}$. Индексы i, j, k отвечают номерам объемов $V_{i,j,k}$ вдоль осей координат. Нумерацию вдоль каждой из осей OX, OY, OZ будем вести, начиная с 2 и кончая $n-1$, $m-1$, $l-1$ соответственно. Узлы с индексами 1, n, m, l являются фиктивными (расположенными вне исходного параллелепипеда). Каждый из объемов $V_{i,j,k}$ можно рассматривать как однородный проводник с сопротивлениями $Rx_{i,j,k}$, $Ry_{i,j,k}$, $Rz_{i,j,k}$ в направлениях осей координат, определяемыми по формуле для сопротивления провода:

$$Rx_{i,j,k} = \frac{hx_i}{\sigma_{i,j,k} hy_j hz_k}, \quad Ry_{i,j,k} = \frac{hy_j}{\sigma_{i,j,k} hx_i hz_k}, \quad Rz_{i,j,k} = \frac{hz_k}{\sigma_{i,j,k} hx_i hy_j}. \tag{5}$$

Сопротивления, пересекаясь в центре объема $V_{i,j,k}$, образуют узлы электрической сетки. Для каждого узла в соответствии с законами Кирхгофа и Ома можно записать уравнение

$$\frac{U_{i-1,j,k} - U_{i,j,k}}{Rx_{i-1,j,k} + Rx_{i,j,k}} + \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i,j,k}}{Rx_{i+1,j,k} + Rx_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j-1,k} - U_{i,j,k}}{Ry_{i,j-1,k} + Ry_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j+1,k} - U_{i,j,k}}{Ry_{i,j+1,k} + Ry_{i,j,k}} +$$

$$+ \frac{U_{i,j,k-1} - U_{i,j,k}}{Rz_{i,j,k-1} + Rz_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j+1,k} - U_{i,j,k}}{Rz_{i,j+1,k} + Rz_{i,j,k}} = 0$$

$$(i = 2, 3, \ldots, n-1; \quad j = 2, 3, \ldots, m-1; \quad k = 2, 3, \ldots, l-1), \tag{6}$$

где каждое слагаемое — величина тока, втекающего в узел (i, j, k) из соседнего узла; в знаменателях — выражения для сопротивлений между узлами; $U_{i,j,k}$ — значения искомых потенциалов в узлах. Уравнение (6) преобразуется к виду

$$k1_{i-1,j,k} U_{i-1,j,k} + k2_{i,j-1,k} U_{i,j-1,k} + k3_{i,j,k-1} U_{i,j,k-1} +$$

$$+ k1_{i,j,k} U_{i+1,j,k} + k2_{i,j,k} U_{i,j+1,k} + k3_{i,j,k} U_{i,j,k+1} + k0_{i,j,k} U_{i,j,k} = R_{i,j,k}, \tag{7}$$

где

$$k1_{i,j,k},\ k2_{i,j,k},\ k3_{i,j,k} \le 0, \tag{8}$$

$$k0_{i,j,k} = \mid k1_{i-1,j,k} + k1_{i,j,k} + k2_{i,j-1,k} + k2_{i,j,k} + k3_{i,j,k-1} + k3_{i,j,k} \mid . \tag{9}$$

Условия Неймана на границе параллелепипеда учитываются путем переноса известных слагаемых (6) в правые части и приравнивания нулю соответствующих коэффициентов в (7), (9). Для граничных условий Дирихле значения $U_{1,j,k}$, $U_{n,j,k}$, $U_{i,1,k}$, $U_{i,m,k}$, $U_{i,j,1}$, $U_{i,j,l}$ определяются в момент задания начальных приближений и не подлежат изменению при работе программы. Очевидно, что граничные условия на плоскостях разрыва электропроводности выполняются автоматически при достаточно мелком разбиении параллелепипеда Ω на элементарные объемы.

Рассмотрим методику формирования элементов матрицы A. На ее диагонали расположим коэффициенты $k0_{i,j,k}$ в порядке первоочередного изменения индекса i от 2 до $n-1$, затем j от 2 до $m-1$ и k от 2 до $l-1$. Последним диагональным элементом является коэффициент $k0_{n-1,m-1,l-1}$. В такой же последовательности нумеруются искомые значения

$U_{i,j,k}$. В каждой строке матрицы ненулевыми являются элементы на местах, соответствующих неизвестным величинам $U_{i-1,j,k}$, $U_{i,j-1,k}$, $U_{i,j,k-1}$, $U_{i+1,j,k}$, $U_{i,j+1,k}$, $U_{i,j,k+1}$. Остальные элементы матрицы полагаем равными нулю. Полученная семидиагональная матрица симметрична. Из условий (8), (9) следует также ее положительная определенность. В памяти компьютера хранятся трехмерные массивы коэффициентов $k0_{i,j,k}$, $k1_{i,j,k}$, $k2_{i,j,k}$, $k3_{i,j,k}$ и свободных членов $R_{i,j,k}$.

Известно [1–3], что скорость сходимости метода сопряженных градиентов определяется числом обусловленности матрицы A с собственными значениями $\lambda_n \geq \cdots \geq \lambda_1 > 0$:

$$\kappa = \mathrm{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_n}{\lambda_1}. \tag{10}$$

Чем ближе κ к 1, тем выше скорость сходимости.

Введем предобусловленную матрицу

$$\widehat{A} = SAS^T, \tag{11}$$

где S — невырожденная матрица, выбранная таким образом, что выполняется условие

$$\mathrm{cond}(\widehat{A}) < \mathrm{cond}(A). \tag{12}$$

Рассмотрим решение системы

$$\widehat{A}\widetilde{y} = \widehat{b} \tag{13}$$

($\widetilde{y} = (S^T)^{-1}U$ и $\widehat{b} = Sb$). Время решения системы (13) значительно меньше времени решения системы (2).

Алгоритм решения системы (13) методом сопряженных градиентов строится так, что в процессе вычислений используется исходная матрица A [3]. Матрица S участвует в расчетах неявно в соответствии с формулой

$$(S^T S)^{-1} = M, \tag{14}$$

где M — симметричная положительно определенная матрица, аппроксимирующая матрицу A. На каждой итерации метода сопряженных градиентов решается некоторая промежуточная система $Mx = y$. Из (9) и (12) получаем

$$S^T \widehat{A} (S^T)^{-1} = S^T S A = M^{-1} A. \tag{15}$$

Отсюда следует, что матрица $M^{-1}A$ подобна матрице $\widehat{A}$, поэтому число обусловленности предобусловленной матрицы $\widehat{A}$ равно отношению наибольшего собственного значения матрицы $M^{-1}A$ к ее наименьшему собственному значению:

$$\mathrm{cond}(\widehat{A}) = \frac{\lambda_{\max}(M^{-1}A)}{\lambda_{\min}(M^{-1}A)}. \tag{16}$$

Таким образом, с одной стороны, матрица M должна быть такой, чтобы промежуточная система на каждой итерации решалась просто, с другой стороны, для повышения скорости сходимости итераций необходимо, чтобы матрица M хорошо аппроксимировала матрицу A.

Упомянутым выше двум противоречивым требованиям хорошо отвечает неполное разложение Холесского, которое получается заменой нулями элементов множителя Холесского L, расположенных в тех же позициях, что и нулевые элементы матрицы A. Если

исключить операции с нулями, то решение промежуточных систем на каждой итерации выполняется быстро при помощи последовательного решения треугольных систем. Рассмотрим алгоритм полного разложения Холесского:

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}},$$
$$l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) / l_{jj}, \tag{17}$$
$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$$
$$(i = 2, 3, \ldots, n; \quad j = 1, 2, \ldots, i-1).$$

Если l_{ij} вычислять при $a_{ij} \neq 0$, а в противном случае полагать $l_{ij} = 0$, то получим алгоритм неполного разложения Холесского, которое выполняется лишь один раз в начале работы программы.

Ненулевыми элементами матрицы A являются коэффициенты $k0_{i,j,k}$, $k1_{i,j,k}$, $k2_{i,j,k}$, $k3_{i,j,k}$, расположенные на ее диагоналях. Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что при $a_{ij} \neq 0$ сумма $\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}$ равна нулю. Учитывая сказанное, получаем следующий алгоритм неполного разложения Холесского:

$$lk0_{2,2,2} = \sqrt{k0_{2,2,2}}$$
$$\text{для} \quad k \quad \text{от} \quad 2 \quad \text{до} \quad l-1$$
$$\text{для} \quad j \quad \text{от} \quad 2 \quad \text{до} \quad m-1$$
$$\text{для} \quad i \quad \text{от} \quad 2 \quad \text{до} \quad n-1$$
$$\text{если} \quad i = 2 \quad \text{и} \quad j = 2 \quad \text{и} \quad k = 2, \quad \text{то} \quad \text{перейти} \quad \text{к} \quad 2$$
$$1: \quad lk1_{i,j,k} = k1_{i-1,j,k}/lk \tag{18}$$
$$lk2_{i,j,k} = k2_{i,j-1,k}/lk$$
$$lk3_{i,j,k} = k3_{i,j,k-1}/lk$$
$$lk0_{i,j,k} = \sqrt{k0_{i,j,k} - lk1_{i,j,k}^2 - lk2_{i,j,k}^2 - lk3_{i,j,k}^2}$$
$$2: \quad lk = lk0_{i,j,k}$$
$$\text{перейти} \quad \text{к} \quad 1.$$

Программа проверена на тестовых примерах. Так же, как в [1], уравнение Лапласа решалось в декартовой системе координат в квадратной области с постоянными граничными условиями первого рода на квадратной сетке. Коэффициенты системы определялись по описанной выше методике для кусочно-однородной среды. Точное решение такой алгебраической задачи при любом числе узлов совпадает с решением дифференциальной задачи и равно 1. Критерием окончания итераций служило условие

$$\frac{\|r^N\|_2}{\|r^0\|_2} \leq \varepsilon = 10^{-5}, \tag{19}$$

где в левой части записано отношение норм векторов невязок на последней N-й и нулевой итерациях. Для разных чисел разбиений nk решение, удовлетворяющее условию (17), получено за различное количество итераций N:

Число разбиений	nk	8	16	32	64	128
Количество итераций	N	8	13	22	34	57

Таким образом, количество итераций соответствует числу итераций решения аналогичной тестовой задачи в [1].

Кроме того, программа проверялась путем решения уравнения Лапласа (1) со значениями U на границе, найденными для заданной гармонической функции, например $U = xyz$. Результаты решения уравнения (1) совпадают со значениями U, вычисленными непосредственно по формуле. При использовании данной программы получены положительные результаты для расчета электрического и магнитного полей алюминиевого электролизера [4].

Список литературы

[1] Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физматлит, 1995. 288 с.

[2] Булеев Н. И. Метод неполной факторизации для решения двумерных задач эллиптического типа // Численные методы динамики вязкой жидкости. Новосибирск: Наука, 1979. С. 31–45.

[3] Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991. 367 с.

[4] Альчиков В. В. Задача расчета магнитных полей алюминиевых электролизеров с учетом влияния ферромагнитных конструкций: Сб. докл. на междунар. семинаре “Алюминий Сибири – 99”. Красноярск, 1999. С. 186–192.

Поступила в редакцию 22 февраля 2000 г.,
в переработанном виде — 6 сентября 2000 г.